Percolación de nodos en redes cuadradas 2d

Felipe Gonzalez

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.

(Dated: May 8, 2019)

A partir de estudios computacionales sobre la percolación de redes de nodos de varios tamaños se logró determinar el comportamiento crítico del sistema. Se determinaron tanto los exponentes críticos como la probabilidad crítica de la red bidimensional con concordancia a lo predicho teóricamente. Se extrapoló para una red infinita una probabilidad crítica tal que existe un cluster percolante para cualquier probabilidad mayor a ella de $p_c(\infty) = (0.593 \pm 0.002)$.

I. INTRODUCCIÓN

Los primeros estudios de percolacion los realizon Flory y Stockmayer alrededor de los años 40, durante la segunda guerra mundial. Usualmente los comienzos de la teoría se atribuyen al trabajo de Broadbent y Hammersley en el año 1957, introduciendo un tratamiento matématico, probabilístico y geométrico del mismo. A pesar de esto, la teoría de percolación enfocada a los exponentes críticos, comenzó a desarrollarse en la década del 70, a partir del trabajo de Essam y Gwilym, que desataron una avalancha de publicaciones en esa época. En resumidas palabras, la teoría de percolación tiene como objetivo, estudiar y resolver de manera simplificada, aunque no de manera exacta, transiciones de fase, a partir de un modelo basado en redes de nodos que pueden estar ocupados o no.

El modelo trabaja con diversas redes, desde redes unidimensionales hasta redes de dimensión infinita, donde cada nodo o sitio de la red tendrá una cierta probabilidad p de estar ocupado o desocupado, y la misma será independiente de la situación del nodo vecino. Grupos de vecinos inmediatos ocupados forman agrupaciones, que comunmente se los conoce como clusters. Uno de los objetivos de este modelo es estudiar el comportamiento del sistema en el rango de probabilidades cercanas a una probabilidad crítica. La misma se corresponde con la aparición del cluster percolante (que atraviesa toda la red de arriba a abajo) en la red utilizada.

II. EL MODELO

A. Transición de fase

Cuando se varía la probabilidad de ocupación de los nodos de una red, se observa que existe un valor de probabilidad a partir del cual aparece un cluster percolante en la red que se está observando. Esto refleja una transición de fase, donde el parámetro de orden de la misma es la intensidad del cluster percolante (definido como el número de nodos que son parte del cluster percolante en relación al total de nodos de la red), el cual es nulo para probabilidades menores o iguales que la crítica, para luego crecer con una ley de potencias a medida que se aumenta

la probabilidad. Uno de los objetivos del estudio de las transiciones de fase es observar el comportamiento de diversas magnitudes asociadas al sistema en un entorno cercano al punto de la transición de fase. El comportamiento de estas magnitudes es diferente en cada caso: ciertas magnitudes presentan discontinuidades, algunas divergen, y otras comienzan a ser distintas de cero. Para explicar este comportamiento, es necesario recurrir a los exponentes crínticos (el comportamiento de las magnitudes puede describirse como leyes de potencia), que son particulares del sistema que se esté analizando. En la próxima sección se ampliará el tema para sistemas percolantes en redes bidimensionales.

B. Leyes de potencia y exponentes críticos

Los exponentes críticos, describen el comportamiento de ciertas magnitudes cerca de una transición de fase. Como se mencionó anteriormente, en percolación, la transición resulta en la aparición de un cluster infinito. Estos exponentes son universales, en el sentido que dependen solo del modelo de percolación utilizado y de la dimensión espacial. La Tabla I resume las principales leyes de potencia obtenidas en la literatura para redes percolantes.

TABLE I. Valores teóricos hallados en la literatura.

Símbolo	Ley	Valor
\overline{d}	_	d=2
D	$M \sim L^D$	D = 91/48
ν	$\xi \sim p - p_c ^{- u}$	$\nu = 4/3$
au	$n(p_c) \sim s^{-\tau}$	$\tau = 1 + d/D$
σ	$z = s^{\sigma}(p - p_c)$	$\sigma = (\nu D)^{-1}$
α	$m_0(p) \sim p - p_c ^{2-\alpha}$	$\alpha = 2 - (\tau - 1)/\sigma$
β	$m_1(p) \sim (p-p_c)^{eta}$	$\beta = \nu(d - D)$
γ	$m_2(p) \sim p - p_c ^{-\gamma}$	$\gamma = (3 - \tau)/\sigma$

La intensidad del cluster percolante está dada por la relación $P \propto |p-p_c|^{\beta}$ para p mayor a p_c , y es nula en otro caso. El número de clusters de tamaño s que aparecen a probabilidad p está dado por la expresión $n_s(p) = q_o s^{-\tau}$. Otra relación importante para obtener el exponente crítico γ , es el momento de orden 2, cuya ecuación es la que sigue:

$m_2(p) = \sum_s s^2 n_s(p) \simeq |p - p_c|^{-\gamma} \tag{1}$

Como se detallará con mayor detalle en la próxima sección, para obtener el exponente τ , es necesario detallar la dependecia del factor q_0 con el exponente crítico τ . En este trabajo, obtendremos inicialmente una primera estimación del exponente crítico τ , sin dar la dependencia de q_0 , y luego, desarrollando otro método, se obtendrá una mejor estimación del mismo. Otro punto importante a señalar es la dependecia de la masa del cluster percolante respecto del tamaño de la red en función de la probabilidad. En el punto crítico, la masa del cluster infinito es proporcional al factor L^{D} del tamaño de la red. D se conoce como dimensión fractal. En probabilidades por encima de la crítica, la masa es en cambio propocional al tamaño de la red L elevado a la dimensión de la red d; como en este trabajo se utilizaron solo redes bidimensionales, se tiene que d=2. Esto se puede ver resumido en la ecuación 2.

$$M(L) = \begin{cases} L^d & \text{si } p > p_c \\ L^D & \text{si } p < p_c \end{cases}$$
 (2)

Con el momento de orden 1, $m_1(p)$, se puede obtener el exponente crítico β , que a su vez se puede obtener a partir de ν y D. Este momento se calcula a partir de la intensidad del cluster percolante. El momento de orden 2, $m_2(p)$ nos da información sobre el exponente γ .

C. Efectos de red finita

Cuando se busca resolver numéricamente problemas de percolación, se tiene acceso a una ventana finita de la red infinita que se propone teóricamente. Cerca de la probabilidad crítica, magnitudes que presentan cambios abruptos en las redes infinitas, lo hacen de manera suave para las finitas. En resumen, el comportamiento de una red de tamaño finito se aparta del correspondiente para tamaño infinito. En cambio, en el punto de transición se encuentra que el sistema está libre de escalas y se pueden utilizar la leyes de exponentes críticos. La ecuación 3 expresa la relación funcional entre el número de cluster de tamaño s, y el valor de s, utilizando una cierta función f(z), la cual es determinada por métodos computacionales. La misma deberá satisfacer las restricciones físicas implicadas. Debido a que en la probabilidad crítica se espera una ley de potencias sobre s, es necesario que f(0) = 1. Además, dado que para un s existe una cierta probabilidad que maximiza el número de clusters de ese tamaño, eso conlleva a que la función f(z) presente un único máximo. La función tambien debe anularse cuando z tiende a $\pm \infty$.

$$n_s(p) = q_0 s^{-\tau} f(z)$$
 , $z = s^{\sigma} (p - p_c)$ (3)

D. Renormalización

Es posible además, explotar el hecho de que cerca de la transición de fase de muestra libre de escalas. Si se reescalea el sistema, deben seguir siendo validas las leyes de potencias anteriores. Esto refleja el hecho que la probabilidad crítica es un punto fijo respecto de la transformación. Dada una probabilidad, si la misma no coincide con la crítica y el sistema es reescaleado, la probabilidad tenderá a dos atractores, el 0 y el 1, dependiendo de donde se tomo la probabilidad inicial. Esto implica que al renormalizar, me alejo del punto crítico. En cambio, si se toma como inicial la crítica, el sistema se mantiene igual al ser reescaleado, se reconstruye a si mismo. Esto se debe a que la distancia de correlación, infinita en p_c , seguirá siendo infinita, puesto que la renormalizacion siempre será sobre un valor finito. Al manterse infinita, implicará siempre estar en p_c . Cabe destacar que la renormalización de celda pequeña solo es válida para redes triangulares y redes bidimensionales. Por otro lado, es importante señalar que hay que elegir el criterio de normalización que mas se asemeje a la situación física del problema.

III. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Se estudiaron redes cuadradas de tamaño L =4, 16, 32, 64, 128 por medio del algoritmo de clasificación de Hoshen-Kopelman [1]. De las mismas se obtuvo la probabilidad crítica por diferentes métodos, uno de ellos promediando varios resultados obtenidos para redes generadas a partir de diferentes semillas de números aleatorios, de los cuales se obtuvo la dispersión y se calculó la probabilidad crítica correspondiente a la red infinita. Se determinaron los exponentes críticos a partir de las leyes dadas para cada uno, estudiando tamaño de clusters, distribución de los mismos en función de la probabilidad, entre otras cosas. Se determina la dimensión fractal Da partir de la masa del cluster percolante, que se calcula como el numero de nodos pertenecientes al mismo, y observando su dependencia con L. A partir del cálculo de la intensidad del cluster percolante se puede obtener el exponente crítico β , modelando su comportamiento cerca de p_c como una ley de potencias. Se verifica la hipótesis de scaling encontrando la forma funcional de la función de scaleo f(z). A partir de la misma, se puede calcular el valor de τ siguiendo la correspondiente ley de potencias ya mencionada. Finalmente, para obtener el exponente γ se realiza un proceso de gamma-matching, donde se calcula el momento de segundo orden y se observa su comportamiento en función de p.

$$M(L) = L^{D} m\left(\frac{L}{\xi}\right) \sim \begin{cases} L^{D} & \text{si } L < \xi \\ L^{d} & \text{si } L \gg \xi \end{cases}$$
 (4)

IV. RESULTADOS

A. Determinación de $p_c(\infty)$, y τ

Se usaron distintos métodos para la determinación numérica del punto crítico, siendo estos la búsqueda de p_{medio} y búsqueda de p_{mediana} . Es importante señalar que la probabilidad crítica corresponderá a la ventana de la red infinita a la que se tiene acceso. Por ello, es que para cada tamaño de red obtendremos diferentes probabilidades críticas, las cuales irán convergiendo a la probabilidad crítica infinita a medida que se aumente el tamaño de la ventana que se está observando. Se comenzó un primer estudio de p_{medio} , con el fin de encontrar la probabilidad crítica. Dado un tamaño de red fijo, se poblaron nodos de la red aleatoriamente a partir de una semilla de números aleatorios y se verificó si la red percolaba o no. En caso afirmativo, se disminuye la probabilidad restándole $\frac{1}{2n}$ (para el enésimo paso) y se vuelve a poblar la red con la misma semilla v esta nueva probabilidad de ocupación de los nodos. En caso negativo, la probabilidad se aumenta en la misma cantidad que se restó en el caso anterior y se realiza el mismo proceso de repoblación de la red. Esto se realizó para los tamaños de red 4, 16, 32, 64 y 128, y se tomó la probabilidad crítica como el valor de probabilidad de la última iteración en que el sistema percola, tomando como precisión la mínima variación de probabilidad que se suma o resta, siendo esta $\frac{1}{2^{12}} \simeq 0.0002$. Se realiza el mismo proceso 27000 veces, en pos de conseguir una muestra razonable para poder hacer estadística.

Los resultados de este experimento se encuentran en la tabla II.

TABLE II. Valores de p_c obtenidos para los distintos tamaños de red con metodo de p_{medio}

Tamaño de red	p_c
4	(0.56 ± 0.10)
16	(0.588 ± 0.044)
32	(0.592 ± 0.027)
64	(0.593 ± 0.017)
128	(0.5926 ± 0.0099)

Como segundo método de estimación de la probabilidad crítica, se estudió el promedio de veces que una red percola en función de la probabilidad de llenado. Se realiza un barrido sobre este parámetro para conseguir la función distribucion F(p) del problema. Siendo que las redes estudiados son de tamaño finito, fueron realizadas 27000 mediciones por cada valor de probabilidad en pos de asegurar que el promedio de las realizaciones se corresponde a la verdadera estadística del problema y reducir la susceptibilidad a *outliers*. Se tomó como probabilidad crítica el valor medio de la distribución de probabilidad f(p).

Sobre las figuras 1 y 2 se pueden ver las función de distribución y la distribución de probabilidad de perco-

lación de la red en función de la probabilidad de llenado (respectivamente). Se puede ver como a medida que crece L, las distribuciones se acercan a la función de Heavyside y la delta de Dirac, como lo predice la teoría.

Tenemos así una herramienta para extrapolar la probabilidad de percolación de una red infinita, siendo que podemos ver que el ancho de las campanas decrece de manera monótona a medida que aumenta el tamaño de la red. Se propone entonces realizar un ajuste lineal sobre la curva de $p_c(L)$ en función del ancho de las distribuciones de probabilidad. Esto se encuentra en la figura 3. Se tiene que realizando este analisis, se llega a una $p_c(\infty) = (0.593 \pm 0.002)$, que es compatible con el valor teórico de $p_{cteo}(\infty) = 0.5927$.

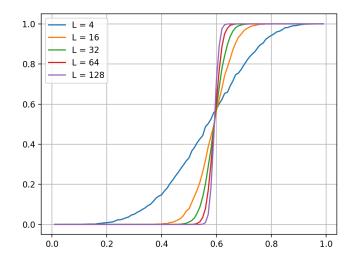


FIG. 1. Funcion distribucion F(p) de la probabilidad de percolacion en funcion de la probabilidad de llenado de la red, para los distintos tamaños de red.

A partir de los valores de probabilidad crítica obtenidos, se obtuvieron datos de tamaños de clusters en la red (s) y número de clusters con tamaño s (n_s) , fijando la probabilidad en $p_c(L)$. Si se grafica n_s vs s en escala logarítmica, según la ley para el exponente crítico τ , se debería observar un comportamiento lineal, cuya pendiente corresponde a este exponente crítico. Esto se puede ver sobre la figura 4, donde se realiza un ajuste que resulta en un valor de $\tau = (1.809 \pm 0.002)$. Tenemos que este valor esta por debajo del predicho teóricamente, y no cumple la restricción de ser > 2 (esto se debe a que se debe cumplir que $\tau = 1 + \frac{d}{D}$, con D < d). Esto se debe a que existe una dependencia entre la ordenada al orígen (q_0) y τ que no esta siendo tenida en cuenta, ya que se cumple que $q_0 = \frac{p_c}{(\tau - 1)}$. Teniendo esto en cuenta, se repite el ajuste y se llega un valor de $\tau = (2.103 \pm 0.004)$ (figura 5). Vemos que este valor no esta lejos del valor teórico de $\tau_{\rm teo} \simeq 2.05$.

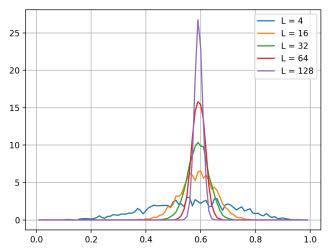


FIG. 2. Distribución de probabilidad f(p) de la probabilidad de percolación en funcion de la probabilidad de llenado de la red. Se puede ver como el momento de orden dos de las distribuciones se achica a medida que crece el tamaño de la red de percolación, resultando en campanas mas finas.

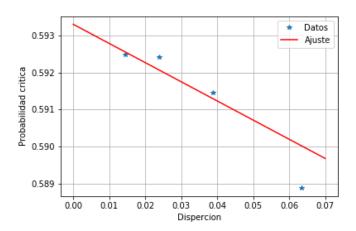


FIG. 3. Ajuste lineal sobre la curva de la probabilidad crítica en función de la dispersion de la medición, $p_c(\infty) = (0.593 \pm 0.002)$

B. Determinación de la dimensión fractal D

Según la Ec. 4 es posible hallar D para un arreglo bidimensional, calculando la masa del cluster infinito en la probabilidad crítica. Se poblaron redes de tamaño 4, 16, 32, 64 y 128 con una probabilidad correspondiente a la probabilidad crítica para cada tamaño. Se realizaron 27000 iteraciones para cada tamaño, y se tomo la masa del cluster percolante como el promedio de la

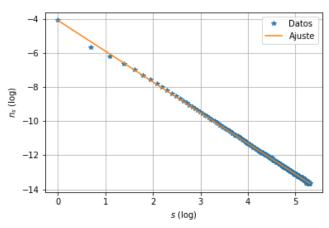


FIG. 4. Ajuste lineal sobre la curva del logaritmo de la distribución de fragmentos n_s en función de el logaritmo del tamaño del fragmento, sin restricción sobre la ordenada al orígen. Se tiene que en estas condiciones el valor de $\tau = (1.809 \pm 0.002)$.

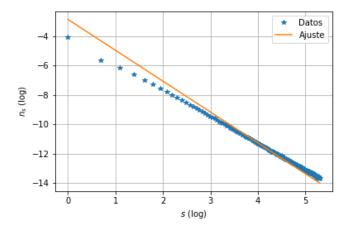


FIG. 5. Ajuste lineal sobre la curva del logaritmo de la distribución de fragmentos n_s en función de el logaritmo del tamaño del fragmento, restringiendo la ordenada al orígen a cumplir la relación correspondiente con el exponente, cuyo valor es $\tau = (2.103 \pm 0.004)$

masa obtenido en cada iteracion. La figura 6 muestra el logaritmo de la masa del cluster percolante en función del logaritmo del tamaño de la red. Tenemos que el ajuste nos deja un valor de $D=(1.84\pm0.01)$, un 5% de diferencia respecto al valor teórico de 1.8958.

C. Obtención de β a partir de la intensidad P_{∞}

A partir de la información en el gráfico de $P_{\infty}(p)$ podemos hallar β , realizando un ajuste en un entorno cer-

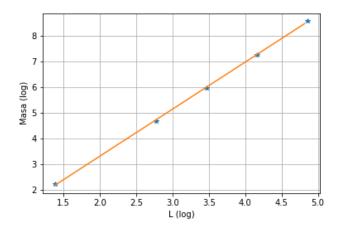


FIG. 6. Ajuste lineal sobre el logaritmo de la masa del cluster percolante sobre $p_c(L)$ en funcion del logaritmo de L. Esto nos da un valor de $D=(1.84\pm0.01)$.

cano al punto crítico. La figura 7, muestra la intensidad del cluster percolante en función de la probabilidad de llenado de la red. Se ilustran los resultados para L=128.

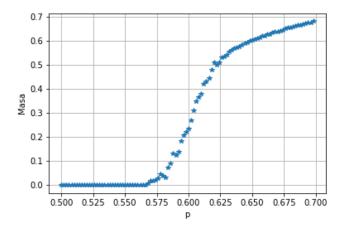


FIG. 7. Masa del cluster infinito en funcion de la probabilidad de llenado de la red. Vemos como se denota una transición de fase, cuyo parámetro de orden es la intensidad del cluster percolante. (L=128)

Se observa que para probabilidades por debajo de la crítica la intensidad del cluster percolante es nula, puesto que para esas probabilidades la red no percola. A partir del punto crítico (valor al cual se espera, teóricamente, que sea el último punto al cual la intensidad es nula) la intensidad comienza a crecer a medida que se aumenta la probabilidad. Así, se tiene una transición de fase de segundo orden (variable continua, derivada discontinua) cuyo parámetro de orden es la misma intensidad del cluster percolante. Se puede ver que la probabilidad en la

cual la intensidad deja de ser nula es ligeramente menor que la esperada para una red infinita, que corresponde con la crítica. Este corrimiento es uno de los efectos de trabajar con redes finitas, puesto que no se tiene acceso a la red infita. Debido a que la intensidad sigue una ley de potencias según el exponente crítico, se calcula el mismo realizando un ajuste sobre la zona creciente de la curva, como se observa en la figura 8.

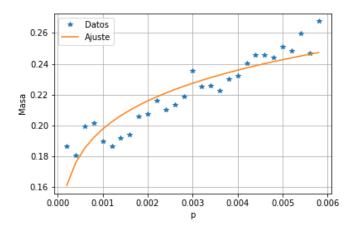


FIG. 8. Ajuste de la relacion de potencia entre la intensidad del cluster infinito en funcion de la probabilidad de llenado de red. Esto corresponde a un valor de $\beta = (0.13 \pm 0.01)$.

Se obtuvo a partir del ajuste un valor de $\beta=(0.13\pm0.01)$, el cual es compatible con el valor teórico, puesto que el mismo es 0, 138.

D. Espectro de fragmentos y verficación de la hipótesis de scaling

La hipótesis de scaling se presenta en la Ec. 3 en donde se observa que para distintos valores de s y $p-p_c$, el espectro de fragmentos debe colapsar en una única curva $f(z) = n_s(p)/n_s(p_c)$, donde $z = s^{\sigma}(p-p_c)$. En consecuencia, verificamos la hipótesis de scaling graficando f(z) y determinando el punto $f_{max} = f(z_{max})$, lo cual se puede observar en la figura 9 para varios valores de s. Este valor se corresponde con una probabilidad p_{max} para cada tamaño de s fijo. La ley de exponente σ sera entonces la siguiente:

$$\ln(p_{\text{max}} - p_c) = -\sigma \ln(s) + \ln(z_{\text{max}}) + C.$$
 (5)

Para obtener este exponente entonces se extraen los p_{max} que cumplen maximizar la función f(z) y se realiza un ajuste lineal sobre la curva que describe la ecuacion 5. Esto se puede ver en la figura 10. Tenemos que la pendiente del ajuste corresponde a $\sigma = (0.40 \pm 0.02)$, que es indistinguible del valor teórico $\sigma_{teo} = 0.39$.

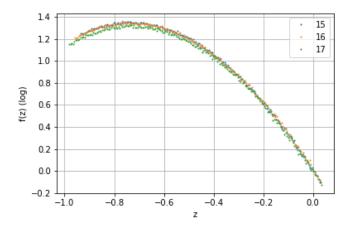


FIG. 9. Logaritmo de la función de scaling en funcion de z para valores de s desde 15 a 17.

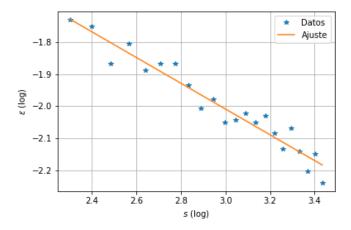


FIG. 10. Ajuste sobre la curva del logaritmo de $\epsilon_{\rm max}$ en función de el tamaño de fragmento s. Corresponde a un $\sigma = (0.40 \pm 0.02)$.

Además, se calculo el exponente γ , a traves del momento de orden 2 de la red, utilizando la relacion descripta en la ecuación 1. Para esto se realizo un barrido de probabilidad de llenado de red en el rango de $0.5 \leq p < 0.7$ con paso de 0.01, promediando 10000 iteraciones para cada probabilidad. Cabe destacar que se tuvo especial cuidado para remover el cluster percolante, así asegurandose estar sumando solo los términos válidos.

Tenemos que el momento de orden 2 de la distribucion de fragmentos se encuentra en la figura 11. Se puede ver que es completamente asímetrica, lo que lleva a proponer algun tipo de medición que tenga en cuenta ambos lados de la función para obtener una mejor medida del exponente. Se comienza proponiendo un γ -matching, que consiste en tomar pendientes de ambos lados de la curva y

en escala logaritmica en función del mínimo apartamiento de epsilon para cada lado, y tomar el γ verdadero como la intersección de ambas mediciones. Sin embargo tenemos que, como lo muestra la figura 12, estas 2 curvas no solo no se tocan sino que la distancia entre ellas crece a medida que crece el apartamiento, por lo que el análisis no es posible.

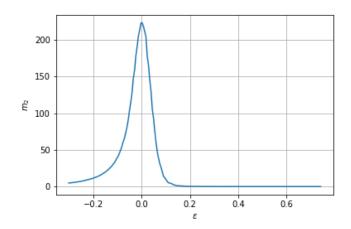


FIG. 11. Momento de órden 2 de la distribución de fragmentos en funcion de $\epsilon.$

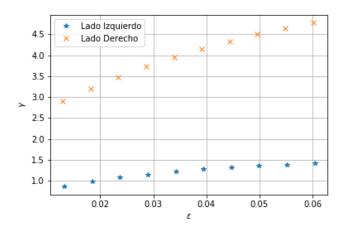


FIG. 12. Ajustes de en función del mínimo ϵ tomado para el ajuste, para ambos lados de m_2 . Vemos que no solo las curvas no se intersecan, sino que tienden a alejarse.

En vez, se propone hacer un ajuste no lineal sobre la curva, excluyendo los puntos muy cercanos al punto crítico para los cuales las mediciones fallan, siendo que es donde el momento debería diverger. Esto se puede ver en la figura 13. Vemos que en este caso se obtiene un mejor ajuste de los datos, resolviendo en un $\gamma=(2.1\pm0.1)$, bastante cerca del valor teórico de $\gamma_{\rm teo}=2.39$.

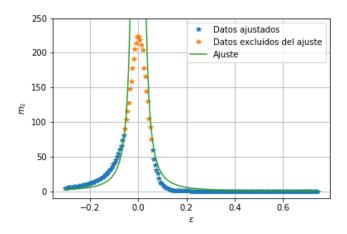


FIG. 13. Ajuste no lineal sobre el momento de órden 2 de la distribución de fragmentos en función de ϵ . Tenemos que esto corresponde a un $\gamma = (2.1 \pm 0.1)$.

V. VERIFICACIÓN DE RESULTADOS POR RENORMALIZACIÓN

Podemos verificar, al menos de manera aproximada, los resulados del las secciones realizando un proceso de renormalzación de $celda\ peque\~na$. Consideramos un porción de red de lado b=2 y la llamamos un super-nodo, el cual va a estar poblado o despoblado teniendo en cuenta algun criterio de renormalización.

Existen diversos criterios, pero exponedremos el criterio de tomar como ocupado aquel supernodo que percola. De esta manera, se tiene que se consideran como ocupa-

dos todos los supernodos que tienen los 4 nodos ocupados y asi también las 4 distintas orientaciones de los que tienen 3 nodos ocupados y por último también 2 de las 6 orientaciones posibles para aquellos supernodos con solo 2 nodos ocupados. Se tiene entonces que la probabilidad de percolación del supernodo en función de la probabilidad de llenado de la red es

$$p' = p^4 + 4p^3(1-p) + 2p^2(1-p)^2.$$
 (6)

Es evidente que tanto 0 como 1 cumplen la condición de punto fijo para es relacion de probabilidades. Además se tiene que otro punto fijo de la ecuación esta en $p_c = 0.61803...$ Vemos que este punto cumple la condición de invarianza de escala, indicador de que uno se encuentra en una transición. Además se cumple que este valor obtenido esta muy cerca del teórico de 0.5927.

VI. CONCLUSIONES

A lo largo de este trabajo se estudió la transición de fase en un modelo de percolación bidimensional, obteniendo la probabilidad crítica, o sea la probabilidad a partir de la cual aparece el cluster percolante en la red, el parámetro de orden, que en este caso es la intensidad del cluster percolante, así como también se obtuvieron los exponentes críticos del modelo cerca de la transición.

Se pudieron encontrar satisfactoriamente los exponentes críticos de la transición, con un error máximo del 10% (para el exponente γ).

El valor obtenido para la probabilidad crítica en el sistema infinito fue de $p_c(\infty) = (0.593 \pm 0.002)$, compatible con el valor teórico de $p_{c\text{teo}} = 0.5927$.

J. Hoshen and R. Kopelman, Physical Review B 14, 3438 (1976).